

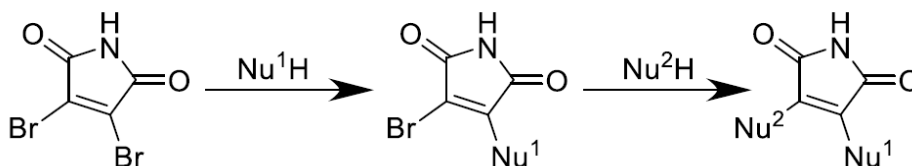
**КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ
СПОСОБНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ 3-БРОММАЛЕИМИДА И 3-
(АРИЛАМИНО)МАЛЕИМИДА**

А. А. Панов^{1*}, Е. Е. Быков¹, А. Ю. Симонов¹, А. М. Королёв¹

¹ФГБНУ «Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф. Гаузе» (ФГБНУ «НИИНА»), Москва 119021, Москва, ул. Б. Пироговская, 11, стр.1.

E-mail: 7745243@mail.ru

Синтез производных малеимида посредством реакции 3,4-диброммалеимида с нуклеофилами является одним из наиболее распространенных способов синтеза 3-(ариламино)-4-броммалеимидов, а также производных 3,4-диаминомалеимида.



Было замечено, что реакционные способности 3,4-диброммалеимида, 3-бром-4-(ариламино)малеимидов и 3-бром-4-(индол-1-ил)малеимида значительно различаются. Так, 3-(ариламино)-4-бром-малеимиды с трудом вступают в реакцию с аминами, в то время как 3-бром-4-(индол-1-ил)-малеимид реагирует довольно активно. Предположения о причине такого различия строились и ранее, но не были подкреплены расчетами.

Методом расчета частичных зарядов на атомах углерода в 3-замещенных-4-броммалеимидах, а также 3D-молекулярным моделированием объяснено различие в их реакционной способности. Изучено влияние различных заместителей на электронную плотность, а также показана существенная роль стерических факторов. Модель 3-(арилтио)-4-бром-малеимида показывает наиболее благоприятной структуру, лишенную стерических препятствий, что может объяснять высокую реакционную способность этого соединения.

Библиографический список

1. 3,4-Дизамещенные малеимиды: синтез и биологическая активность / А. А. Панов, А. Ю. Симонов, С. Н. Лавренов [и др.] // ХГС. – 2018. – №2. – С. 103–113.
2. Панов А. А., Симонов А. Ю., Королёв А. М. Синтез новых производных 3-(арилтио)малеимида // ЖОрХ. – 2019. – № 12. – С. 1850–1856.
3. Панов А. А. Новые производные трииндолилметилиа со сниженной токсичностью. / А. А. Панов, А. Ю. Симонов, С. Н. Лавренов [и др.] // Российский биотерапевтический журнал. – 2018. – №17. – С.55–56.